



Université de Jijel

Département de microbiologie appliquée

et des sciences alimentaires

Spécialité : 1ère année de microbiologie appliquée

Rapport TP :

Logiciels Libres et Open Source

Réalisé par :

- Tebibel Amina
- Bensaali Douae
- Bellour Naila

Proposé par :

Dr : Bensalem

Année universitaire :

2025/2026

Sommaire

PARTIE 1 – Étude théorique de COPASI :

1. Présentation générale de COPASI.
2. Fonctionnalités principales.
3. Aspects techniques.
4. Points forts.
5. Limites et points faibles.
6. Conclusion.
7. Référence.

PARTIE 2 – Étude pratique : exploration de Zenodo :

1. Présentation de Zenodo.
2. Description des étapes réalisées.
3. Métadonnées du dataset.

PARTIE 3 – :

1. Créer un compte Github.
2. Créer un nouvel entrepôt.
3. Mettre le rapport réalisé (partie I t partie II) dans l’entrepôt créé.

PARTIE 1 – Étude théorique de COPASI :

1. Présentation générale de COPASI :

COPASI (COMplex Pathway Simulator) est un logiciel open-source de modélisation, simulation et analyse de réseaux biochimiques dynamiques. Il a été conçu pour permettre aux chercheurs en biologie, biochimie, microbiologie et biotechnologies d'étudier des systèmes biologiques complexes sans coder manuellement les équations mathématiques sous-jacentes. ([OUP Academic][1])

Initialement développé comme successeur de Gepasi par Pedro Mendes et coll , COPASI supporte une large palette de tâches analytiques — de la simulation de dynamiques temporelles à l'estimation de paramètres et à l'analyse de sensibilité. ([OUP Academic][1])

Il peut être utilisé via :

- **CopasiUI** : interface graphique complète pour création, simulation et analyse des modèles.
- **CopasiSE** : version en ligne de commande adaptée aux workflows automatisés ou aux calculs en arrière-plan. ([OUP Academic][1])

2. Fonctionnalités principales :

2.1. Définition et représentation des modèles biologiques :

COPASI permet de « décrire un système biologique en termes de réactions chimiques, espèces (molécules), constantes cinétiques et compartiments biologiques ». L'utilisateur définit ces éléments à partir d'une interface intuitive et COPASI transforme automatiquement ces descriptions en équations mathématiques (par exemple ODE). ([PMC][2])

2.2. Standards et compatibilité :

- **SBML (Systems Biology Markup Language)** : format standard pour partager et échanger des modèles entre outils et bases de données internationales.
- **Export/Import SED-ML** : permet de standardiser des expériences de simulation.

Ces standards facilitent la réutilisation de modèles provenant de bases telles que « BioModels Database ». ([PMC][2])

2.3. Simulation des dynamiques :

COPASI supporte :

- **Simulation déterministe** via des intégrateurs d'ODE (ex. LSODA) adaptés aux systèmes raides ou non.
- **Simulation stochastique** basée sur des algorithmes comme « Gillespie's Direct Method » ou « Gibson–Bruck », utiles pour des systèmes à faible nombre de molécules.
- **Approches hybrides** , combinant stochastique et déterministe. ([OUP Academic][1])

2.4. Analyses avancées :

COPASI propose plusieurs méthodes d'analyse :

- Steady state et stabilité linéaire.
- Scans de paramètres et Monte Carlo.
- Estimation de paramètres.
- Sensibilité locale et globale.
- Contrôle métabolique.
- Lyapunov exponents pour caractériser des dynamiques complexes. ([OUP Academic][1])

2.5. Sorties et visualisation :

Résultats sous forme de :

- ✓ Graphiques (courbes de temps, histogrammes).
- ✓ Tableaux exportables.
- ✓ Génération de code (C, Berkeley Madonna) pour réutilisation externe. ([OUP Academic][1])

3. Aspects techniques :

3.1. Architecture logicielle :

COPASI est écrit en C++ et conçu de manière modulaire :

- Couche de modélisation.
- Couche de calcul.

Cette séparation permet une maintenance facile et l'intégration dans des pipelines externes.

L'interface graphique repose sur **Qt**, tandis que les calculs utilisent des bibliothèques numériques reconnues telles que **LSODA**, **BLAS** et **LAPACK** pour assurer rapidité et fiabilité. ([OUP Academic][1])

3.2. Algorithmes de simulation :

Détaillés dans la littérature, les simulations stochastiques et déterministes reposent sur des algorithmes validés :

- **LSODA** (intégration ODE adaptative)
- **Gillespie** et **Gibson–Bruck** pour stochastique
- **τ -Leap** pour accélérer les simulations avec grand nombre d'événements. ([PMC][2])

3.3. Interopérabilité :

COPASI peut lire des modèles SBML et convertir au besoin des réactions réversibles pour des simulations stochastiques. ([PMC][2])

4. Points forts :

➤ Simplicité d'utilisation :

Interface conviviale qui permet à un biologiste sans compétences avancées en programmation de construire des modèles complexes. ([OUP Academic][1])

➤ Large éventail d'analyses :

De la simple simulation aux techniques avancées de sensibilité et d'optimisation. ([PMC][2])

➤ Interopérabilité :

Supporte les standards SBML/SED-ML, facilitant l'intégration avec d'autres outils et bases de données. ([PMC][2])

➤ Communauté et maturité :

COPASI est largement utilisé dans la recherche biomédicale, notamment dans l'analyse de voies métaboliques ou de signaux cellulaires complexes. ([Nature][3])

5. Limites et points faibles :

➤ Accès aux bases de données cinétiques :

COPASI par défaut n'a pas d'accès direct et intégré à des bases de données cinétiques (ex. BRENDA, KEGG) — ce qui nécessite souvent une préparation manuelle ou l'utilisation d'outils complémentaires comme CytoCopasi. ([OUP Academic][4])

➤ Courbe d'apprentissage :

Certaines analyses avancées (estimation robuste de paramètres, hybridations stochastique/déterministe) exigent une compréhension conceptuelle approfondie. ([OUP Academic][1])

➤ Performance pour grands modèles :

Pour les très grands réseaux (ex : métabolisme complet d'une cellule), les simulations stochastiques répétées peuvent être coûteuses en temps de calcul sans solutions HPC. ([PubMed][5])

6. Conclusion :

COPASI est un outil puissant et fiable pour la modélisation et la simulation de systèmes biologiques complexes. Il permet d'étudier les réseaux métaboliques, les voies de signalisation et les mécanismes de régulation cellulaire grâce à ses simulations déterministes et stochastiques, ainsi qu'à ses analyses avancées de sensibilité et d'estimation de paramètres.

L'adoption de standards internationaux comme **SBML** assure la reproductibilité et l'interopérabilité des modèles, facilitant leur partage et leur intégration dans des workflows expérimentaux ou computationnels. En microbiologie, COPASI offre une approche « prédictive et quantitative », complémentaire aux données expérimentales, permettant de mieux comprendre le comportement dynamique des systèmes cellulaires.

Malgré quelques limites pour les très grands réseaux ou en l'absence de données cinétiques complètes, COPASI reste une « référence incontournable en biologie des systèmes », combinant puissance analytique, flexibilité et accessibilité.

7. Références:

1. Hoops S., Sahle S., Gauges R., et al. COPASI: a COMplex PATHway SIMulator. Bioinformatics. 2006. ([OUP Academic][1])
2. Documentation officielle COPASI (site web). ([COPASI][6])
3. COPASI and its Applications in Biotechnology (Sci. Direct / PMC). ([sciencedirect.com][7])
4. Condor-COPASI: high-throughput computing for biochemical networks (PubMed). ([PubMed][5])
5. CytoCopasi: extension pour intégration avec Cytoscape et bases de données. ([PubMed][8])
6. Applications récentes de COPASI en biologie des systèmes (ex : modélisation de voies de signalisation). ([Nature][3])
7. [https://academic.oup.com/bioinformatics/article/ "COPASI—a COMplex Pathway SIMulator | Bioinformatics | Oxford Academic"](https://academic.oup.com/bioinformatics/article/\)
8. [https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/ "COPASI and its Applications in Biotechnology - PMC"](https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/\)
9. [https://www.sciencedirect.com/science/article/ "COPASI and its applications in biotechnology - ScienceDirect"](https://www.sciencedirect.com/science/article/\)

PARTIE 2 – Étude pratique : exploration de Zenodo

1. Présentation de Zenodo :

Objectifs de la plateforme Zenodo :

La plateforme Zenodo a été créée pour répondre aux besoins de la recherche moderne et de la **Science Ouverte**. Ses principaux objectifs sont :

1. **Favoriser l'Open Science (Science Ouverte) :** Permettre à tous les chercheurs de partager les résultats de leurs travaux, quel que soient leur domaine, leur taille ou leur financement.
2. **Assurer la pérennité des données :** Offrir un dépôt sécurisé à long terme pour les contenus qui n'ont pas de place spécifique dans d'autres archives (comme les petits jeux de données ou les logiciels).
3. **Attribution d'identifiants uniques (DOI) :** Chaque dépôt reçoit un DOI (Digital Object Identifier), ce qui rend les données citables dans les publications scientifiques.
4. **Faciliter la réutilisation des données :** En utilisant des normes de métadonnées comme **Dublin Core** ou **Darwin Core**, Zenodo permet aux autres chercheurs de trouver, comprendre et réutiliser les datasets facilement.
5. **Accessibilité universelle :** Supprimer les barrières d'accès aux connaissances scientifiques, particulièrement important pour les chercheurs en Sciences de la Nature et de la Vie.

Types de contenus hébergés par Zenodo :

Zenodo est une plateforme polyvalente qui accepte une grande variété de formats numériques. Parmi les contenus que l'on y trouve fréquemment, on peut citer :

1. **Jeux de données (Datasets) :** Il s'agit du type de contenu le plus pertinent pour votre travail. Ils peuvent inclure des séquences génomiques, des mesures de laboratoire ou des données d'observation.
2. **Logiciels et Codes (Software) :** Zenodo permet aux chercheurs de sauvegarder et de citer des versions spécifiques de leurs codes de calcul ou scripts de bioinformatique.
3. **Publications :** La plateforme héberge des articles en accès libre (Open Access), des pré-publications (Preprints), des thèses et des mémoires.
4. **Images et Vidéos :** Des clichés de microscopie, des schémas explicatifs ou des enregistrements d'expériences peuvent y être déposés.
5. **Présentations et Posters :** Les chercheurs partagent souvent les supports visuels utilisés lors de conférences scientifiques.

Intérêt pour les Sciences de la Nature et de la Vie :

L'intérêt de Zenodo pour domaine réside dans sa capacité à rendre la recherche transparente et reproductible. Il permet notamment :

- i. Le partage rapide de données critiques (ex: génomes de virus ou de bactéries).
- ii. La collaboration entre chercheurs du monde entier grâce à l'accès gratuit aux données.

2. Description des étapes réalisées sur Zenodo

La méthodologie suivie pour l'exploration de la plateforme et l'acquisition des données a été structurée comme suit :

1. **Accès à la plateforme** : La première étape a consisté à se rendre sur le portail officiel de Zenodo via l'adresse <https://zenodo.org/>.
2. **Exécution de la recherche** : Une recherche de jeux de données a été lancée en utilisant une requête comportant au moins l'un des mots-clés obligatoires, exemple : *genome*.

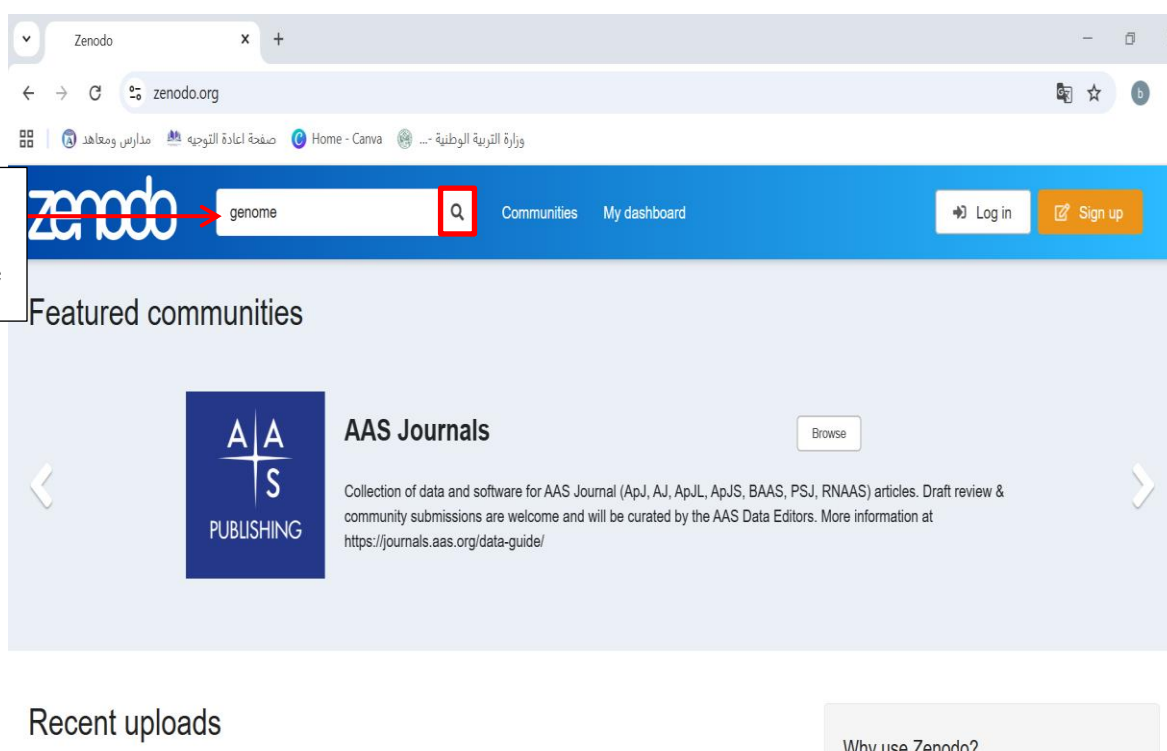


Figure 01 : Interface de recherche Zenodo utilisant le mot-clé «*genome*».

3. **Filtrage des résultats** : Afin d'affiner les résultats obtenus, le type de contenu a été restreint à « Dataset » via les options de filtrage situées dans la colonne latérale.

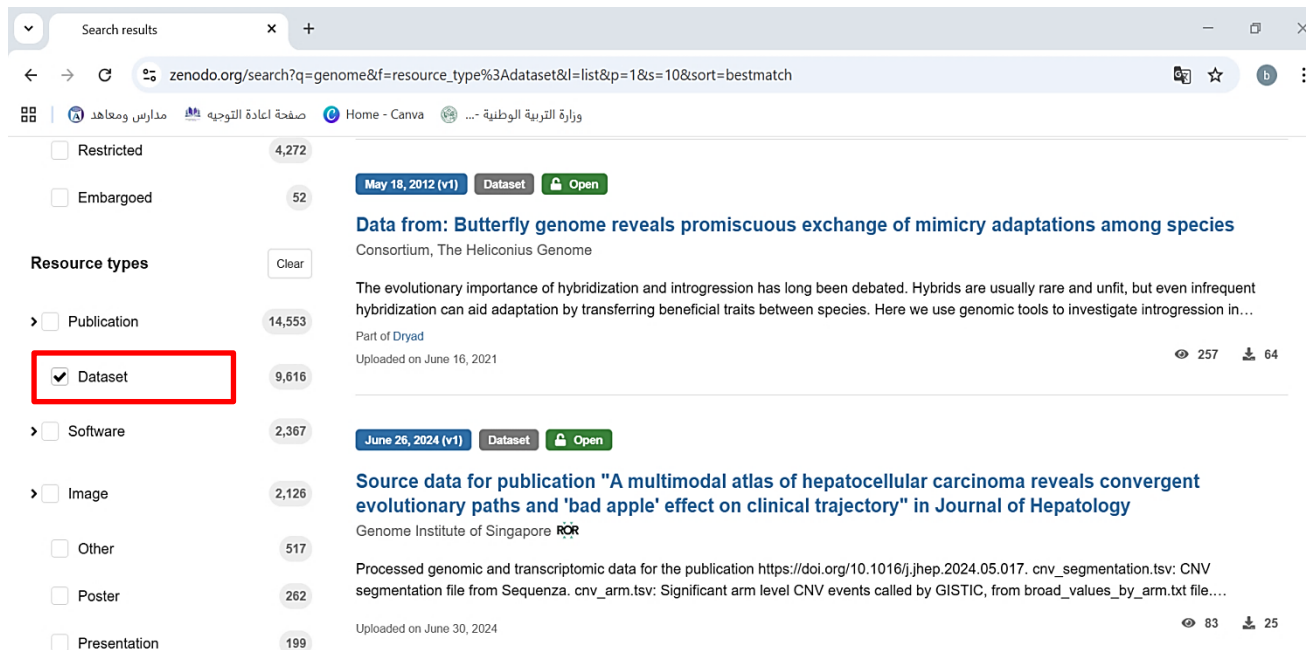


Figure 02 : Application du filtre « Dataset » pour affiner les résultats de recherche.

4. **Sélection du dataset** : Un jeu de données jugé pertinent pour le domaine des sciences de la nature et de la vie a été sélectionné parmi les résultats affichés.

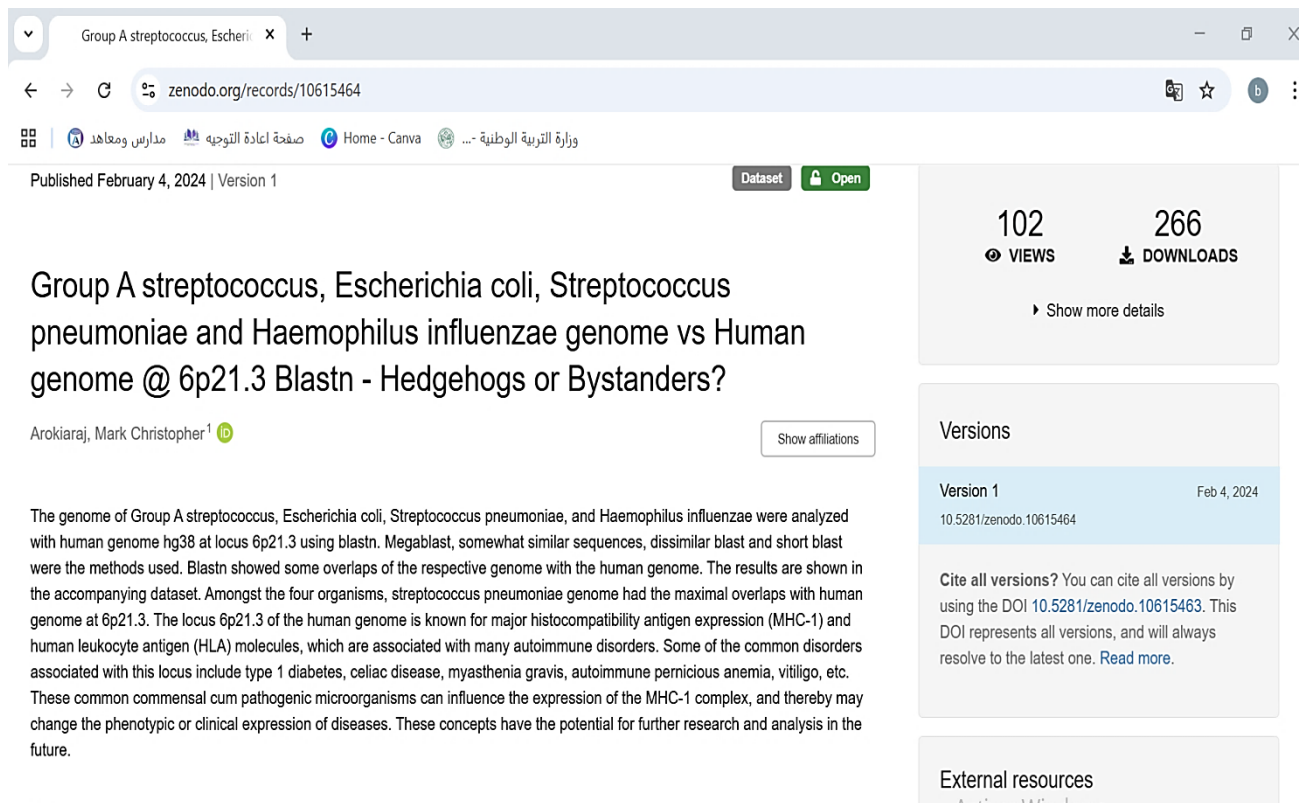


Figure 03 : Présentation du jeu de données sélectionné relatif aux sciences de la nature et de la vie.

5. **Téléchargement du fichier** : Une fois le choix arrêté, le jeu de données a été téléchargé pour une analyse plus approfondie.

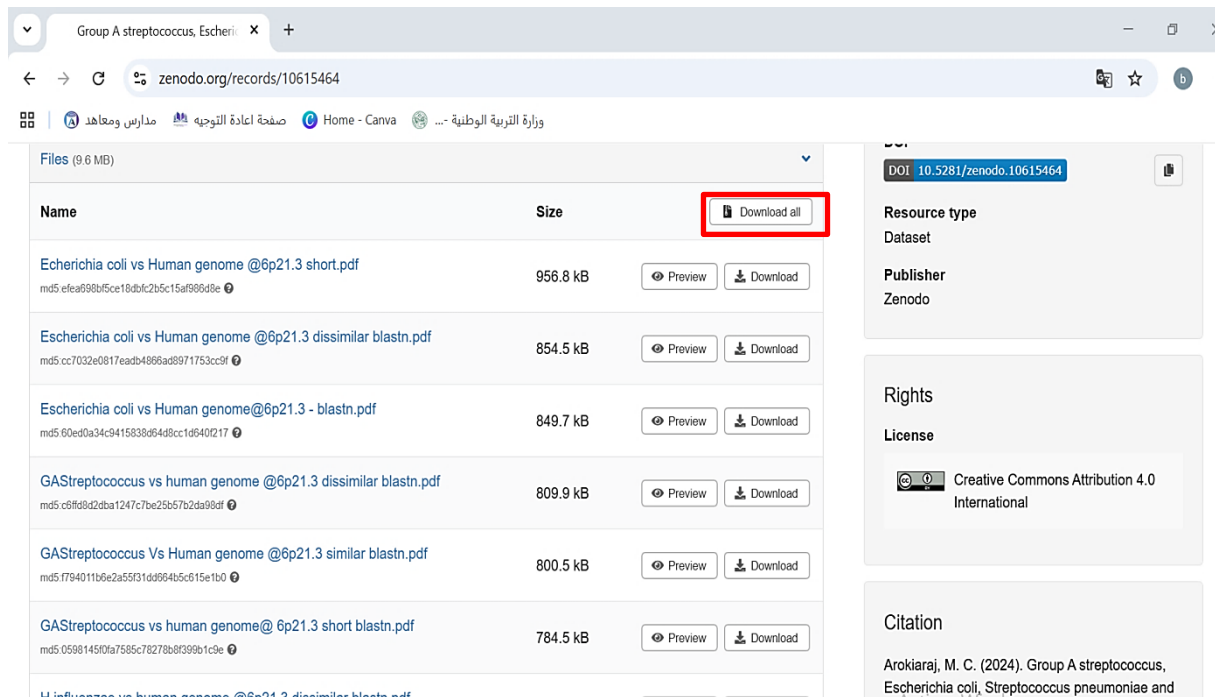


Figure 04 : Section de téléchargement des fichiers et détails techniques du dataset.

6. **Récupération des métadonnées** : Les informations descriptives du dataset ont été extraites en accédant au bloc « Export » de la page, en utilisant *Dublin Core*.

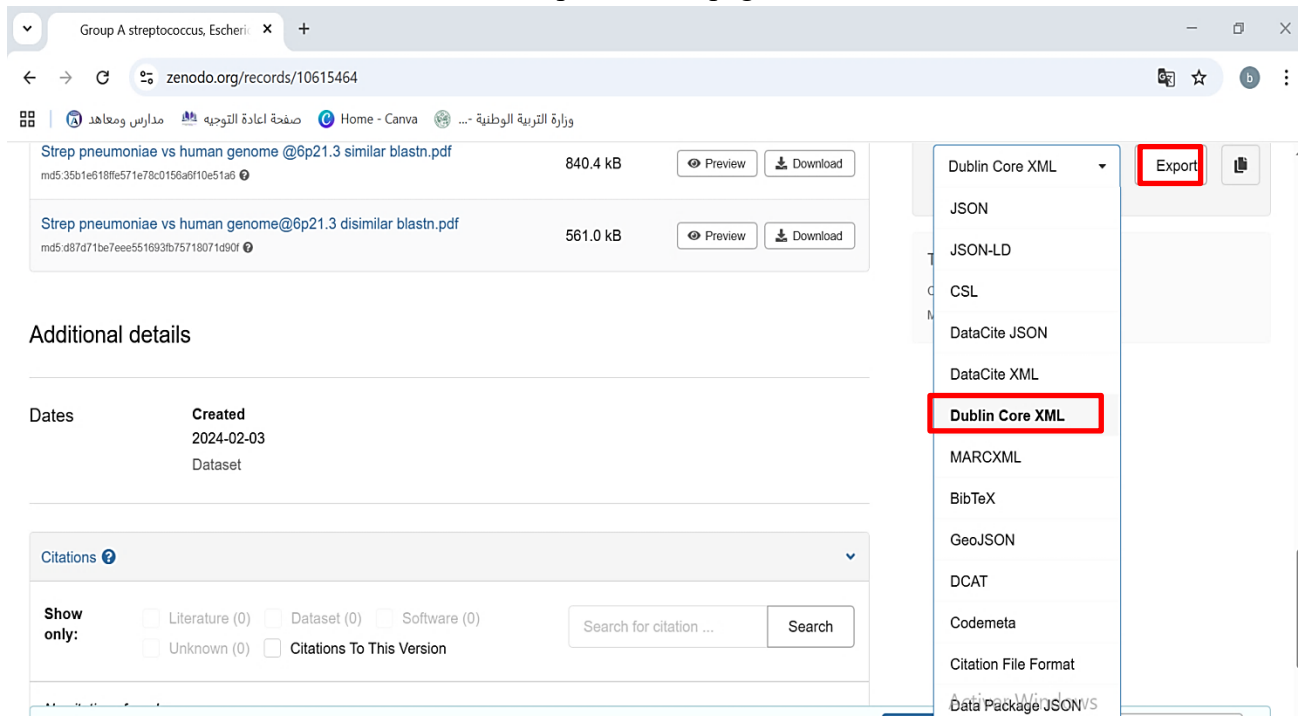


Figure 05 : Visualisation des métadonnées du dataset selon la norme Dublin Core.

3. Métadonnées du dataset :

Métadonné e	Information extraite
Titre	<i>Group A streptococcus, Escherichia coli, Streptococcus pneumoniae</i> and <i>Haemophilus influenzae</i> genome vs Human genome @ 6p21.3 Blastn - Hedgehogs or Bystanders?
Créateur	Arokiaraj, Mark Christopher
Date	2024-02-04
DOI	-https://doi.org/10.5281/zenodo.10615464
Subject	<i>Streptococcus pneumoniae, Haemophilus influenzae, Group A streptococcus, Escherichia coli</i> , Human genome, Blastn, 6p21.3, MHC1 complex.
Type	info:eu-repo/semantics/other
Publisher	Zenodo